
北京市重点实验室 2016 年度报告

实验室名称:材料基因工程北京市重点实验室

依托单位:北京科技大学

联系人:乔利杰

联系电话:010-62334499

手机:13311587087

电子邮箱:lqiao@ustb.edu.cn

北京市科学技术委员会

二〇一六年制

第一部分：年度报告

一、重点实验室简介

材料基因工程北京市重点实验室瞄准北京市重点行业材料领域中急需解决的关键共性问题，依照材料基因工程的核心思路，系统性地开展材料高通量计算与集成设计技术研究、高通量材料制备与快速表征技术研究、材料基因组数据分析与挖掘技术研究，并高质量将三者融为一体，建设先进材料一体化设计研发创新平台。力争大幅度缩短新材料的研究开发进程、大幅度提高材料研发技术创新能力，进而大幅度提升北京市汽车、航空航天、石化、机械、冶金、电子、建材等重点行业领域的竞争力，及时应对国际化竞争的严峻形势，为北京建设全国科技创新中心贡献力量。“长江学者”特聘教授、国家杰出青年基金获得者、新材料技术研究院教授乔利杰担任实验室主任。第一届学术委员会主任由中国科学院院士、清华大学教授王崇愚担任；中国工程院院士、中科院物理所研究员陈立泉，中国科学院院士、香港科技大学首席教授张统一，“长江学者”讲座教授、宾夕法尼亚州立大学教授陈龙庆分别担任学术委员会副主任。

二、2016 年度主要工作情况

（一）发展规划及目标完成

1. 规划目标完成情况

对照《北京市重点实验室认定申请书》中“三年主要工作规划、预期目标与水平”，“实验室研发投入计划”，“科研条件和配套设施改善计划”、“队伍建设及人才培养计划”等，综述本年度完成情况（**注意：**已参加绩效考评的实验室请对照《北京市重点实验室三年绩效考评报告》中“未来三年发展规划”完成本部分内容）。

各研究中心同步开展相应的材料多尺度计算与材料集成设计研究、材料快速表征与评价方法研究、材料基因组工程数据库与材料科学数据库研究、材料一体化研发与创新平台建设与研究。多组分材料跨尺度集成设计与精确制备技术项目全面启动。开展了高温合金材料的示范应用，根据材料最终需要的性能，并结合数据库中的大量高温合金的数据，完成了材料组织成分筛选，基于 Ni8 数据库，运用热力学软件 Thermo-Calc 进行模拟计算，预测了合金元素对析出相的影响以及各析出相析出规律，完成了对新型三代高温合金的显微组织和成分筛选。基于有限元模拟仿真技术和数据库中的本构关系等数据，对粉末高温合金制备中关键的热变形工艺进行了模拟计算，预测了其热变形行为，为热变形参数的合理选择提供了重要依据。根据模拟计算结果实验试制了粉末

高温合金盘坯，并进行了部分性能测试，抗拉强度为 1250MPa。开发完成了储能材料和高性能结构材料数据库服务平台，目前进入测试阶段。通过高通量计算，已积累无机晶体结构数据库中含锂化合物离子输运数据 1600 余条，用于储能材料数据库服务平台的设计与构建；目前整合新增文献数据 4560 条，已汇交到国家材料科学数据共享网。

2. 下一年度发展计划

形成具有中国自身特色的材料工程的共性关键技术（材料数据共享平台技术），并据此建成方便实用的的数据服务平台。除公益性数据互联网共享服务外，提供定向资源共享以及专题性的定制服务，探索公益性共享与定向服务数据共享机制和方式。初步实现线下的跨层次多尺度材料设计计算方法“直通车”在设计应用上的突破，初步实现一个点对点的材料计算软件间的自动联通方法；将材料科学和计算机科学相结合，开展材料组织结构观察、力学性能测试等高通量实验，结合第一性原理、分子动力学和数值模拟等计算方法，获取实时、多源异构海量数据；探究支持向量机、深度学习等方法对模型可靠性与仿真精度的影响规律；通过图像融合新技术，建立复杂图像数据关联与检索方法；开发材料高通量数据的采集、解析、传输、存储和应用的全流程数据生产、加工、共享与服务的软/硬件平台。初步形成具有中国自身特色的材料工程的共性关键技术二（材料设计支撑平台技术），建设和开通材料设计支撑服务平台。材料设计新方法验证及应用示范研究。积极开展数据共享平台和设计支撑的宣传、培训，形成在中心内部及各大钢厂的应用示范 2-3 项。形成具有中国自身特色的材料工程的共性关键技术三（基于共享平台的定向服务技术），提供专题性的定制服务。完成已实现的示范性应用的分析总结，在合作各方同意的前提下列入网上平台予以展示推广。

（二）研究水平与贡献

1. 定位与研究方向情况

定位与研究方向发展变化情况

材料基因组工程北京市重点实验室瞄准北京市重点行业材料领域中急需解决的关键材料（高温合金、超高强钢、耐特殊环境高强合金和能源材料等）和共性技术问题，通过整合北京科技大学材料计算、实验表征和数据工程的研究队伍和资源，重点开展高通量材料计算与设计、高通量材料制备与表征、海量材料数据分析与挖掘技术，以及集材料计算-实验-数据技术和资源为一体的材料研发和工程化的研究。主要研究方向包括：（1）高通量材料计算与设计共性技术研究。构建材料基因组工程技术创新认知机理与问题求解方法体系，发展高通量材料计算的算法、模型和程序。（2）高通量材料制备与表征技术的研发。开展融合材料计算+试验+数据为一体的材料快速定量表征与材料科学评价研究，

包括材料多尺度组织结构定量表征、宏微观性能测试表征、材料疲劳、断裂和腐蚀行为的快速测试和表征方法和技术，以及材料综合评价以及寿命预测方法。（3）海量材料数据分析与挖掘技术研究。（4）材料一体化研发和工程化技术研究。以高性能钢铁材料和高温合金等关键材料为切入点和示范实例，建设北京地区针对具体材料类型与品种的数据分析和反馈平台，面向北京地区和全国服务。发挥北京科技大学在钢铁材料领域的强大优势，以汽车用超高强韧钢等新型金属结构材料为主要载体，研究多层次跨尺度模型之间的内在联系与数据传递规律，建立材料多层次跨尺度集成设计技术、信息与数据支撑系统及制备新技术。

2. 研究成果水平

介绍实验室 2016 年的代表性成果并概述研究成果水平

（1）利用结合基于密度泛函的第一性原理与内聚有限元的跨尺度计算方法研究金属铝 (Al) 的大气腐蚀行为与机理。采用第一性原理计算了 O₂ 和 H₂O 分子在金属 Al 表面的单吸附与共吸附行为研究金属 Al 钝化膜的形成机理，结果表明单分子 O₂ 能够自发解离吸附在表面，但吸附的 O 原子不能向亚表面渗透，表面 O₂ 分子可导致 H₂O 分子的解离。对于无缺陷金属 Al 表面，钝化膜在 H₂O 和 O₂ 的共同作用下形成。利用第一性原理研究 H 原子在金属 Al 表面的吸附、在亚表面和内部的溶解以及从表面向内部的扩散，通过对能量的分析可获得 H 原子的最稳定吸附、溶解位和最优扩散路径以及扩散需克服的能垒。建立了金属 Al 晶界和块体材料模型，通过计算获得的溶解能可知晶界处更容易捕获 H 原子。随着晶界处 H 原子浓度的升高，晶界强度下降。将获得的晶界结合能输入到内聚有限元计算之中模拟晶间裂纹的萌生和扩展，实现跨尺度计算。

（2）开展了高温合金材料的示范应用，根据材料最终需要的性能，并结合数据库中的大量高温合金的数据，完成了材料组织成分筛选，基于 Ni8 数据库，运用热力学软件 Thermo-Calc 进行模拟计算，预测了合金元素对析出相的影响以及各析出相析出规律，完成了对新型三代高温合金的显微组织和成分筛选。基于有限元模拟仿真技术和数据库中的本构关系等数据，对粉末高温合金制备中关键的热变形工艺进行了模拟计算，预测了其热变形行为，为热变形参数的合理选择提供了重要依据。根据模拟计算结果实验试制了粉末高温合金盘坯，并进行了部分性能测试，抗拉强度为 1250MPa。

（3）基于材料集成计算思路，研究了多层次跨尺度的材料设计方法。针对镍基粉末高温合金，分析镍基粉末高温合金微观组织特征（相组成、析出相数量、晶粒尺寸大小及晶界形态）与材料性能以及加工性能之间的关系，并结合设计材料服役性能要求，进行组织和工艺设计。实现 γ' 相含量控制在 45%~55% 之间，晶粒尺寸控制在 5~7 级（40~28 μm ），保证 750~800°C 长期时效过程中无 TCP 相析出。

（4）开发完成了储能材料和高性能结构材料数据库服务平台，目前进入测试阶段。通过高通量计算，已积累无机晶体结构数据库中含锂化合物离子输运数据

1600 余条，用于储能材料数据库服务平台的设计与构建；目前整合新增文献数据 4560 条，已汇交到国家材料科学数据共享网。

(5) 为满足服役环境和制造工艺对水电站用高强度厚板的新要求，采用了科学成分设计、精细化 HAZ 组织设计、以细化晶粒为核心的全流程工艺设计等技术，成功开发出能够满足水电站建设中野外恶劣施工环境对高强度钢板高韧性储备、低预热、大热输入窗口的苛刻要求的新一代易野外焊接大型水电站用 600MPa、800MPa 级高强度厚板/特厚板产品。其中北京科技大学材料设计团队的主要贡献：材料成分和工艺设计优化方法研究和显微组织、晶粒尺寸、硬度等一系列计算预测模型的研发。

(6) 在数据共享平台中试行数据共享 DOI 注册与发表技术，继续网上互动性数据预测及可靠性评估与适用性评估等在线工具开发与相关技术研究。完善 2015 年度已上网公开试用的在线工具与技术，并再研究 2-3 种并上网试用。完成钢铁材料数据库共享平台上线三年试运行自我评估，在此基础上提供新版的平台使用手册。

3. 实验室作为创新平台对建设全国科技创新中心所发挥的作用

(1) 对首都经济社会发展的贡献（通过开展的具体工作阐述科技对首都经济社会发展的支撑引领作用，满足首都经济社会发展的需求）

全面实施“科技北京”战略，持续推进竞争力提升，更好地服务于区域和全国创新发展；并把集成和整合各方面创新资源、推进产学研用的有机结合、构造形成高效有力的首都创新资源平台、提升创新和成果转化能力，放在了科技创新工作的首位。材料基因组工程北京市重点实验室的建设，正好是集成各方面材料创新资源、推进产学研用的有机结合、构造形成高效有力的首都材料创新资源平台、提升材料创新和成果转化能力的主要举措。其重要意义，并不仅限于材料行业本身，更直接扩展和辐射至汽车、航空航天、石化、机械、冶金、电子、建材等重点行业中的材料应用领域。

(2) 行业引领及贡献（针对行业的重大、关键技术问题开展技术研究的具体工作）

研究制定一套高通量、多层次跨尺度一体化的储能材料和高性能结构材料设计方法体系。构建储能材料和高性能结构材料数据库服务平台。开展锂二次电池、高温高强合金设计方法体系的示范应用。高温高强合金设计方法体系的示范应用：对备选材料的物理化学特性进行计算；初步实验验证测试“备选材料”方案；发明储能材料及高性能结构材料的“备选材料”1-2 种；对“备选材料”的性质与性能全面测试、优化。材料基因组工程将现代多学科尖端科学技术（如芯片技术、微细加工技术、薄膜技术、自动化技术、大科学装置表征技术、信息技术等）引入到材料研发中，其实施的关键是以“组合材料芯片”为代表的高通量材料合成与表征平台技术，不仅可以直接应用于某一类具体材料的研发，加速研发周期，也是系统地验证材料计算结果、建立完善的数据必不可少的实验保障手段。同时，材料科学系统工程强调材料科学作为“大

科学”工程，需要不同学科和专业领域的科学家紧密合作，针对重点材料集团作战，集中力量进行攻关，才能充分发挥跨学科合作的互补优势，快速取得核心材料研究成果，实现突破国外技术封锁的目标。

（三）队伍建设与人才培养

1. 实验室主任与学术带头人作用

（1）实验室主任简介

（200 字以内）

如果实验室主任有变更，需详细说明变更理由及学术委员会对主任变更的意见

乔利杰，实验室主任。国家杰出青年基金获得者，“长江学者”特聘教授，教育部创新团队带头人，全国优秀科技工作者，第四届“973”材料领域咨询专家组成员，“863”新材料主题项目“基于材料基因工程的材料设计、制备与表征”首席科学家。兼任中国腐蚀与防护学会监事长、“Materials Letters”、“Journal of Scanning Probe Microscopy”、《自然科学进展》、《中国腐蚀与防护学报》等杂志编委。发表 SCI 收录论文 300 余篇，出版专著 3 部，编辑 2 部，获省部级科技进步一等奖 3 项，二等奖 6 项。

（2）实验室主任与学术带头人作用

综述实验室主任、学术带头人在实验室发展建设上的作用。

实验室主任全面负责组织实施实验室的建设、发展、科研、管理、人才培养及对外交流工作。根据《材料基因组工程北京市重点实验室建设管理办法》和《材料基因组工程北京市重点实验室工作条例》的有关条款进行实验室的管理工作，定期召开各个研究中心主任和课题组长会议，研究工作，制定政策，以稳定实验室固定技术队伍及促进科研人员的流动和学科的相互渗透，努力吸收和培养青年科技人员，吸收有成就的出国留学、进修人员来实验室工作，以保持本实验室科研人员的队伍的合理结构。

杜振民，北京科技大学材料科学与工程学院教授、博士生导师、副院长。1962 年 12 月生于河北石家庄。主要从事相结构与相平衡、材料热力学、材料动力学和材料设计等领域的教学科研工作。1986 年 6 月在北京钢铁学院金属材料与热处理专业获硕士学位；1988 年 10 月至 1990 年 10 月获日本政府奖学金在京都大学工学部“International Course for Graduate Students”学习。现任国际学术期刊《Calphad》副主编，国内学术期刊《物理学报》、《Chinese Physics B》、《材料热处理学报》及《金属热处理》编委，中国物理学会相图专业委员会副主任委员兼秘书长、中国机械工程学会热处理分会常务理事和国家自然科学基金委员会工程与材料学部专家评议组成员等。国家 863 新材料主题项目“多组分材料跨尺度集成设计与精确制备技术”（2013-2015）首席科学家。

尹海清，教授、工学博士、博士生导师。长期从事粉末冶金、材料数据与数据库建设、第一性原理计算与模拟等领域的研究工作，主持和参与承担完成了国

家 973 计划、国家科技基础条件平台建设项目、863 计划、国家自然科学基金项目、民口配套项目和 Kennametal-USTB 国际合作科研项目 10 余项。获省部级科技成果奖一等奖 1 项，二等奖 1 项。1996 年毕业于西安交通大学材料科学与工程学院，1996-2000 年在北京化工大学任讲师，2000-2002 年在日本大阪大学做客座研究员，从事三维金刚石结构的 TiO₂ 陶瓷基光子晶体的研究。2002 年至今在北京科技大学材料学院，主要从事粉末冶金新技术的研究和材料数据库的建设研究。2011 年在国际上粉末冶金研究领域最具影响力的美国宾夕法尼亚州立大学 CISP 做访问学者。2006 年入选北京市科技新星计划。现任亚洲材料数据委员会 (AMDC) 委员，中方联络人，《粉末冶金工业》编委。北京市女教授联谊会成员。发表论文 40 余篇，SCI 收录 20 余篇，EI 收录 30 余篇。

2. 队伍结构与创新团队建设

综述实验室科研团队人员结构及围绕主要研究单元的创新团队建设情况。(专职科研人员不少于 20 人，具有副高级技术职称以上(含)人员不低于三分之一)。

本实验室现有全职固定研究人员 30 人(详见附件 1)，其中教授 18 人，副教授 9 人，非高级专业技术职务 3 人，其中包括长江学者/杰青 2 人，青年千人 1 人，青年拔尖人才 1 人，新世纪优秀人才 3 人。近年来获得教育部科技成果一等奖、冶金科学技术二等奖、宝钢教育奖、国家级教学名师、全国优秀科技工作者、国际青年体视学家奖等 20 余种重要奖项。聘用岗位分为固定和流动两种。固定人员包括学术骨干及其梯队人员、具有丰富实验经验的实验室技术人员和管理人员；流动人员包括特聘教授、协议制研究人员、客座研究员、访问学者、博士后以及博士和硕士研究生等。其中实验室固定编制占 40%，流动编制占 60%。实验室实行分级聘任，分类管理。实验室主任由上级主管部门北京科技大学聘任，实验室副主任、各研究中心主任由实验室主任提名，由依托单位聘任，研究人员由各研究中心主任考核聘任。

3. 青年骨干人才培养

综述引进及培养青年人才的政策措施及实施效果。

随着全球经济不断繁荣，对人才的需求和竞争越来越激烈，本实验室根据自身定位和发展，有目的、有力度的引进和培养高水平人才，争取打造一支年龄、学历和学缘结构合理的、高水平的国际化人才队伍，为建设一流的北京市重点实验室奠定坚实的基础。合适的政策才能为优秀的人才提供制度保障。将在学校的大力支持下，进一步强化有关措施，确保高层次人才能够“引得进、留得住、发挥好”。例如：王鲁宁教授，博士生导师，为中组部“青年千人计划”入选者。从美国引进的人才张达威教授于 2016 年获得北京市科技新星称号，并作为课题负责人参加了国家重点研发专项 2017 年项目的申报工作。庞晓露，在 2016 年被评为北京市科技新星。

(四) 开放交流与运行管理

1. 学术委员会作用

学术委员会召开情况及对实验室建设工作的指导作用。

实验室成立由 9-11 位国内外专家组成的学术委员会，由中国科学院院士、中国工程院院士和国内外知名学者组成。负责实验室建设目标、发展规划、学科建设和发展、科研方向和学术活动、人才培养和开放课题等重大问题的研究、制定和控制。审议实验室的发展目标、任务和研究方向，审议实验室的重大学术活动、年度工作，审批开放研究课题、组织论文答辩及成果评价。学术委员会会议每年召开一次。学术委员会按照《材料基因组工程北京市重点实验室学术委员会工作条例》开展工作。

2. 开放交流

综述实验室的开放交流、对外服务情况及对实验室发展的促进作用。（对外服务包括技术服务、产品服务、测试服务等）

(1) 12 月 22 日至 23 日，2017 第二届北京科技大学——日本东北大学双边交流会在北京科技大学成功召开，共有来自北京科技大学和日本东北大学 60 余位师生参加了此次学术交流活动。该交流活动由北京科技大学和日本东北大学主办。

(2) 2016 年 9 月 22 日，美国宾州州立大学 Zi-Kui Liu（刘梓葵）教授应邀来北京科技大学，与众多师生进行了交流与探讨。

(3) 2016 年 6 月 30 日，由国家材料科学数据共享网主办，北京科技大学承办的“2016 材料科学数据培训研讨会”在北京西郊宾馆会议中心成功召开。本次会议共吸引了来自北京科技大学、钢铁研究总院、北京理工大学等二十多家材料数据相关优势单位的研究人员和学生参加，参会人数共七十四人

3. 协同创新

综述实验室与其他实验室/工程中心合作、组建或加入产业技术创新联盟等产学研合作情况、开展“京津冀协同创新”等区域合作情况。

材料基因组工程北京市重点实验室研发的材料基因组工程关键技术和共性技术、建设的材料基因组数据库与材料科学数据共享服务体系，以及融计算、实验观测与表征评价、材料数据共享三者为一体的材料一体化研发创新平台，可望大幅度缩短新材料的研究开发进程，大幅度提高材料研发技术创新能力，进而大幅度提升北京市汽车、航空航天、石化、机械、冶金、电子、建材等重点行业领域的竞争力，及时应对国际化竞争的严峻形势，有助于确保北京市科技创新在全国的领先地位。目前初步形成具有中国自身特色的集成计算钢铁材料工程的共性关键技术，建设和开通两大平台（钢铁材料数据共享资源网站，构建钢铁材料设计支撑服务平台），面向钢铁行业共性技术协同创新中心所有参加单位和个人开放，提供资源共享以及专题性的定制服务，同时承担对（国家）材料科学数据共享网的运维、更新和升级等的部分工作。

4. 运行管理与机制创新

综述实验室的管理机制、激励创新的政策措施及实施情况。

由中国科学院院士、中国工程院院士和国内外知名学者组成重点实验室学术委员会。由实验室主任、副主任和有关人员组成重点实验室管理委员会。实验室实行主任负责制。实验室主任全面负责组织实施实验室的建设、发展、科研、管理、人才培养及对外交流工作。实验室的日常科技管理、人事管理、财务管理、物资管理、基建管理、外事工作、档案资料图书借阅、安全保卫和保密工作等各项管理工作均按照依托单位有关管理制度的规定执行，并接受依托单位党委和行政组织领导、监督和检查。实验室的人才培养中的学位授予工作，依托北京科技大学材料科学与工程学院学位分委员会进行。实验室以“以人为本”、充分调动和发挥每个成员的积极性为基本管理的原则。明确各个成员的工作和职责、权利和义务，奖罚分明。

5. 依托单位支持

综述依托单位对实验室在人、财、物等方面的支持政策及落实情况。

北京科技大学全力支持材料基因组工程北京市重点实验室的建设，在人力、物力、财力与政策等方面对于实验室的建设和发展给予重点支持和保证，为其人才引进提供优惠条件，为来实验室工作的客座人员提供后勤保障等。实验室建成后将对首都高校、科研院所及企事业单位开放。

三、其他（包括对科技创新基地建设的建议等）

无。

第二部分 重点实验室发展建设情况表

一、2016 年度基本情况表							
基本 信息	实验室 名称	材料基因工程北京市重点 实验室	依托单位	北京科技大学		共建单位	无
	目前实 验室主 任	乔利杰	职称	教授	手机	13311587087	邮箱 lqiao@ustb.edu.cn
	认定时 实验室 主任	乔利杰	目前学术委员会主 任	王崇愚		认定时学术委员会 主任	王崇愚
	主要运 行地址	北京科技大学					
	认定时 研究方 向	依托北京科技大学，以材料学科与材料一体化集成设计研发的雄厚优势，瞄准北京市重点行业材料领域中急需解决的关键共性问题，依照材料基因组工程的核心思路，系统性地开展材料高通量计算与集成设计技术研究、高通量材料制备与快速表征技术研究、材料基因组数据分析与挖掘技术研究，高质量地建设融三者为一体的先进材料一体化设计研发创新平台和材料基因组工程北京市重点实验室，以大幅度缩短新材料的研究开发进程，大幅度提高材料研发技术创新能力，进而大幅度提升北京市汽车、航空航天、石化、机械、冶金、电子、建材等重点行业领域的竞争力，及时应对国际化竞争的严峻形势，确保北京市科技创新在全国的领先地位。					
研 究 水 平 与	目前研 究 方 向	研究方向				负责人	
		承担科技计划项目	年份	国家科技计划项目（科技 部项目）、		省部级科技计划项目	

贡献	研究成果水平		国家自然科学基金委员会项目							
			数量(项)	财政经费(万元)	数量(项)	财政经费(万元)				
		2016	5	1169.0	1	199.0				
		发明专利申请(项)	国内	PCT 申请		发明专利授权(项)	国内	国际		
			0	0			0	0		
		研究论文(篇)	国内(中文核心)			国外(仅限 SCI(SSC I)、EI 收录)			著作(部)	
			5			12			1	
		制(修)订技术标准(项)	国际标准		国家标准		行业标准		地方标准	
			0		0		0		0	
		其他	(主要填写等同于发明专利的成果数量,如新药证书、动/植物新品种、临床新批件等)							
		获奖(项)	国家级奖项			其他省部级奖项				行业协会等其他奖项
			特等	一等	二等	特等	一等	二等	三等	0
			0	0	0	0	0	0	0	
技术创新的贡献度	技术合同(项)	1	技术性收入(万元)	100.0	其中委托单位为在京单位(项)	0	技术性收入(万元)			

		新技术/新产品 (项)		0		直接经济效益 (万元)					
队伍建设与人才培养	队伍结构情况	认定时专职人员数量	30	现有专职人员数量	30	副高级(含)以上职称数量及所占比例	27 90.0%	副高级(含)以上职称中40岁(含)以下数量及所占比例	27 100.0%	博士数量及所占比例	29 96.67%
	青年骨干人才培养情况	引进数量				千人计划		海聚工程		其他	
		培养数量		39		科技北京领军人才		科技新星		1 其他	
		博士(人)		13		硕士(人)		22		职称晋升(人/次) 3	
开放交流与运行管理	开放交流	开放课题(项)	0	总金额(万元)		访问学者(人/次)	0	是否有实验室网站	否	实验室网站网址	
		学术委员会召开次数	0	主/承办国际会议(次)	0	在国内外会议做特邀报告(人/次)	3			主/承办全国性会议(次)	3
		仪器设备纳入首都科技条件平台数量(台/套)	0	纳入条件平台仪器设备原值总金额(万元)	0.0	纳入条件平台仪器设备对外提供有偿服务次数	0			纳入条件平台仪器设备对外提供有偿服务总金额(万元)	0.0

		国际科技合作基地 (国家级/市级/否)		否			北京市科普基地 (是/否)		否
依托单 位 支持	实验室现有研 发面积 (m ²)	新增科研 面积 (m ²)	实验室现有 仪器设备数 量 (台/套)	现有仪 器 设备原 值 (万 元)	新增仪 器 设备数 量 (台/ 套)	新增仪 器 设备原 值 (万 元)	经费投入 (万元)	1400.0	
	1880.0		20	1600.0	1	56.0			

二、研究成果情况明细表

1、科研计划项目

①承担国家科技计划项目（仅限科技部项目）、国家自然科学基金委员会项目（课题）

序号	项目（课题）名称	主持人	财政经费（万元）	项目类型	项目类别
1	材料基因工程专用数据库架构、标准规范与数据库	尹海清	441.0000	国家重点研发计划	A
2	新型 Fe-Mn-Al-C 系低密度钢的相关系与合金设计研究	杜振民	60.0000	国家自然科学基金	A
3	新型镍基高温合金组合设计与全流程集成制备	杜振民	528.0000	国家科技重大专项	A
4	基于物理气相沉积的组合薄膜材料芯片高通量制备	杨会生	60.0000	国家科技重大专项	B
5	多晶块材中“特异”晶粒的 3D 实验观测及行为规律研究	刘国权	80.0000	国家自然科学基金	A
6	材料基因工程大数据技术的示范应用	宿彦京	511.0000	国家重点研发计划	A
7	高通量材料实验大数据采集与加工技术	班晓娟	427.0000	国家重点研发计划	A

备注:

- (1) 项目类型指: 863 计划、973 计划、国家科技重大专项、国家自然科学基金等。
- (2) 项目类别有 A、B 两类, A 是指重点实验室牵头主持的课题, B 是指重点实验室参与的课题。
- (3) 如承担国家科技计划项目子课题, 可填写子课题名称, 任务书约定的财政经费, 类别为 A。
- (4) 跨年度项目以立项年度为统计依据, 财政经费以任务书中约定的经费为统计依据, 不包括依托单位配套经费。本次仅统计 2016 年立项项目。例: 某项目 2015 年立项, 财政经费 300 万, 在 2016 年下拨, 则该项目不统计在内。

②承担省部级项目(课题)

序号	项目(课题)名称	主持人	财政经费(万元)	项目类型	项目类别
1	材料基因工程关键技术及其在镍基高温合金、金属锂负极中的应用研究	尹海清	199.0000	北京市科技计划项目	A

备注:

- (1) 项目类型指: 教育部创新团队发展计划、北京市科技计划项目等。
- (2) 项目类别有 A、B 两类, A 是指重点实验室牵头主持的课题, B 是指重点实验室参与的课题。
- (3) 如承担省部级项目子课题, 可填写子课题名称, 任务书约定的财政经费, 类别为 A。
- (4) 跨年度项目以立项年度为统计依据, 财政经费以任务书中约定的经费为统计依据, 不包括依托单位配套经费。本次仅统计 2016 年立项项目。例: 某项目 2015 年立项, 财政经费 300 万, 在 2016 年下拨, 则该项目不统计在内。

2、研究论文（无重点实验室署名的不予填写）、专著

①研究论文（无重点实验室署名的不予填写）

序号	论文题目	作者	发表时间	刊物名称	国际/国内	SCI影响因子	分区
1	材料科学数据共享网及其在材料行业创新发展中的应用	尹海清	2016-05	中国科技资源导刊	国内		
2	Prediction of the equivalent elastic modulus of mush zone during solidification process coupled with phase field simulations	张瑞杰	2016-01	Computational Materials Science	国际		
3	Austenite grain growth behavior of a GCr15 bearing steel cast billet in the homogenization heat treatment process	李志强, 温志, 张瑞杰, 李志	2016-07	Journal of Materials Research	国际		
4	Large carbide dissolution in GCr15 continuously cast billet core	李志强, 温志, 苏福勇, 张瑞杰	2016-04	International Journal of Materials Research	国际		
5	基于 MGI 的粉末冶金全流程数据模型表示及应用方法研究	姜雪	2016-04	粉末冶金技术	国内		
6	两种三维晶粒长大理论模型比较	王耀华, 王浩, 刘国权	2016-9	金属热处理	国内		

7	纯铁三维显微组织的尺寸和拓扑特征	王耀华, 王浩, 刘国权, 薛维华	2016-01	金属热处理	国内		
8	体视学、图像分析、生物医学、材料科学与金相学、CT、仿真等多学科交叉协同发展的历史见证	刘国权	2016-03	中国体视学与图像分析	国内		
9	Matrix description of the complete topology of three-dimensional cells	薛维华, 王浩, 刘国权, 孟利 等	2016-05	Scientific Reports	国际		
10	Analysis on topological grain forms via large-scale serial sectioning experiment and Monte Carlo simulation	薛维华, 王浩, 刘国权 等	2016-06	Materials Letters	国际		
11	The topologies of contacting grains in two and three dimensions	薛维华, 王浩, 刘国权 等	2016-07	Materials Letters	国际		
12	The effect of hydrogen on the evolution of intergranular cracking: a cross-scale study using first-principles and cohesive finite element methods	Xin Wei, Chaofang Dong, Zhanghua Chen, Kui Xiao, Xiaogang Li	2016-06	RSC Advances	国际		
13	Co-adsorption of O ₂ and H ₂ O on Al (111) surfaces: a vdW-DFT study	Xin Wei, Chaofang Dong, Zhanghua Chen, Kui Xiao, Xiaogang Li	2016-06	RSC Advances	国际		
14	A DFT study of the adsorption of O ₂ and H ₂ O on Al (111) surfaces	Xin Wei, Chaofang Dong, Zhanghua Chen, Kui Xiao, Xiaogang Li	2016-06	RSC Advances	国际		

15	Ab initio calculation and electrochemical verification of a passivated surface on copper with defects in 0.1 M NaOH	Aoni Xu, Chaofang Dong	2016-08	Electrochemistry Communications	国际		
16	Passivity Breakdown on Copper: Influence of Temperature	Chaofang Dong, Feixiong Mao, Shujun Gao	2016-09	Journal of The Electrochemical Society	国际		
17	Electrochemical investigation and ab initio computation of passive film properties on copper in anaerobic sulphide solutions	Decheng Kong, Aoni Xu, Chaofang Dong	2016-12	Corrosion Science	国际		

备注:

为方便各学科之间 SCI 期刊进行比较和评价,中国科学院国家科学图书馆世界科学前沿分析中心对目前 SCI 核心库加上扩展库期刊的影响力等因素,以年度和学科为单位,对 SCI 期刊进行 4 个等级的划分。《JCR 期刊影响因子及分区情况》将各学科的 SCI 期刊分为 1 区(最高区)、2 区、3 区和 4 区四个等级。具体分区情况请参照 2016 年最新分区表。

②专著

序号	专著名称	作者	出版时间
1	材料大辞典(第二版) 材料科学基础分支	刘国权	2016-09

3、专利、动/植物新品种、新药证书、临床批件、数据库等

序号	名称	编号	申请/授权	获得时间	国内/国际	类型	PCT 申请
1	一种钛合金基体上制备纳米羟基磷灰石梯度涂层的方法	201610985992.7	申请	2016-11	国内	专利	否
2	一种具有介孔结构的碳化铬/碳纳米复合材料的制备方法	201610041673.0	申请	2016-01	国内	专利	否
3	一种生产碳复合无定形氧化钒粉末的方法	201610592630.1	申请	2016-07	国内	专利	否
4	一种纳米碳化铬粉末的制备方法	201610042070.2	申请	2016-01	国内	专利	否

备注：

- (1) 国内外内容相同的不得重复统计。
- (2) 类型：分为专利（仅包括发明专利）、新药证书、数据库、动/植物新品种、临床批件等。
- (3) PCT 为 Patent Cooperation Treaty（专利合作协定）的简写，是专利领域的一项国际合作条约，即在一个专利局（受理局）提出的一件专利申请（国际申请），申请人在其申请中（指定）的每一个 PCT 成员国都有效，从而避免了在几个国家申请专利，在每一个国家都要重复申请和审查。
- (4) PCT 申请填写是、否即可。

4、制（修）订技术标准

序号	名称	编号	类型	类别
----	----	----	----	----

备注：

- (1) 类型分别为国际标准、国家标准、行业标准、地方标准四类。
- (2) 类别有 A、B 两类，A 是指重点实验室牵头制（修）订的技术标准，B 是指重点实验室参与制（修）订的技术标准。

5、获奖成果

序号	项目名称	奖项名称	奖项等级	奖项类别	评奖单位	主要完成人	主要完成人排名	获奖时间
----	------	------	------	------	------	-------	---------	------

备注：

- (1) 奖项名称指国家自然科学奖、北京市科学技术奖等。
- (2) 奖项等级指特等、一等、二等、三等四类。
- (3) 奖项类别指国家级、省部级、行业协会三类。其中国家级仅限“国家最高科学技术奖、国家自然科学奖、国家技术发明奖、国家科学技术进步奖和国际科学技术合作奖”5类。
- (4) 评奖单位指科技部、教育部、北京市科委等单位。

6、技术创新

①技术合同

序号	技术合同名称	主持人	委托单位	委托省份	时间	技术合同类型	合同额（万元）
1	北京科技大学产学研合作	曲选辉	山东银光钰源轻金属精密	山东	2016-04	技术开发	100.0

备注：

技术合同类型包括四类：技术开发、技术转让、技术服务和技术咨询。

②新技术、新产品

序号	新技术、新产品名称	产业化地点	直接经济效益（万元）	技术水平
----	-----------	-------	------------	------

备注：

- (1) 新技术\新产品需要有《国家战略性创新产品证书》、《北京市新技术新产品（服务）证书》等证明文件。
- (2) 技术水平：国际领先、国际先进、国内领先、国内先进等。
- (3) 同一新技术、新产品只统计一次。

三、队伍建设情况明细表

1、专职人员

序号	姓名	性别	出生日期	职称	实验室职务	所学专业	最后学位	学术兼职	高端人才情况	
									人才类型	获得时间
1	乔利杰	男	1957-06-08	正高	实验室主任	断裂与环境断裂, 分子动力学模拟	博士	无		
2	杜振民	男	1962-12-05	正高	实验室副主任	材料热力学计算与数据库评估	硕士	无		
3	曲选辉	男	1960-09-12	正高	其他	粉末冶金新工艺研发	博士	无		
4	刘国权	男	1952-05-21	正高	其他	材料计算、优化设计与数据库	博士	无		
5	马星桥	男	1957-12-03	正高	其他	相场计算模拟、原子尺度计算	博士	无		
6	李长荣	女	1961-02-12	正高	其他	材料热力学计算与数据库评估	博士	无		
7	陈冷	男	1964-01-13	正高	其他	金属材料实验研发与表征	博士	无		
8	董建新	男	1965-06-09	正高	其他	材料计算模拟与材料表征	博士	无		
9	郑裕东	女	1966-03-09	正高	其他	新材料实验研发与表征	博士	无		
10	于广华	男	1966-12-07	正高	其他	新材料实验研发与表征	博士	无		
11	常永勤	女	1973-10-23	正高	其他	介观尺度材料计算模拟	博士	无		

12	尹海清	女	1972-09-12	正高	实验室副主任	数据库管理与数据挖掘	博士	无		
13	范丽珍	女	1975-09-24	正高	其他	无机非金属材料数据库与材料研发	博士	无		
14	王鲁宁	男	1980-05-08	正高	其他	新材料模拟和实验研究	博士	无		
15	申江	男	1957-03-05	正高	其他	第一性原理计算、原子尺度模拟	博士	无		
16	白洋	男	1979-04-12	正高	其他	超材料设计与开发、铁性功能材料	博士	无		
17	杨平	男	1959-07-16	正高	其他	高性能金属材料研发与表征	博士	无		
18	何新波	男	1970-08-18	正高	其他	粉末注射成形技术基础与应用研究	博士	无		
19	王海成	男	1980-06-23	副高	其他	新材料模拟和实验研究	博士	无		
20	庞晓露	男	1981-10-27	副高	其他	新材料实验研发与表征	博士	无		
21	贺芳	女	1982-04-12	副高	其他	新材料模拟和实验研究	博士	无		
22	张虎	男	1982-05-18	副高	其他	新材料实验研发	博士	无		
23	张瑞杰	男	1977-03-16	副高	其他	计算材料模拟与数据工程	博士	无		
24	章林	男	1980-04-20	副高	其他	高温合金设计及制备	博士	无		

25	郭翠萍	女	1977-08-17	副高	其他	材料热力学计算与数据库评估	博士	无		
26	滕蛟	男	1975-07-04	副高	其他	新材料模拟和实验研究	博士	无		
27	吴茂	男	1981-09-12	副高	其他	高性能复合材料及焊接技术	博士	无		
28	孟利	男	1978-08-18	中级	其他	材料数据库、材料研发与表征	博士	无		
29	王浩	男	1979-09-13	中级	其他	材料数据库、介观尺度计算模拟	博士	无		
30	姚志浩	男	1982-09-14	中级	其他	新材料实验研发	博士	无		

备注：

- (1) 专职人员：指经过核定的属于实验室编制的人员。
- (2) 职称只限填写正高、副高、中级、其它四类。
- (3) 实验室职务：实验室主任、实验室副主任、学科带头人、实验室联系人、其他。
- (4) 学术兼职：标明兼职机构团体名称、任职情况、任职时间等。
- (5) 高端人才情况：是否院士、享受国务院特殊津贴专家、万人计划、千人计划、长江学者、国家杰出青年科学基金获得者、国家优秀青年科学基金获得者、博士生导师、百人计划、科技北京领军人才、海聚工程人才、高聚工程人才、市科技新星等。

2、人才引进

序号	类型	姓名	数量
1	千人计划		
2	海聚工程		

3、人才培养

序号	类型	姓名	数量
1	科技北京领军人才		
2	科技新星	庞晓露	1
3	职称晋升		3
4	毕业博士		13
5	毕业硕士		22

备注：人才培养中博士、硕士指研究方向与实验室方向吻合，且在考评期内毕业的学生数量。

四、学术委员会召开情况表

1、学术委员会名单（一般 7-15 人，依托单位人员不超 1/3）

序号	姓名	单位	职称	研究方向	学术委员会职务
1	王崇愚	清华大学	正高	第一原理电子结构计算和动力学模拟；多尺度算法建模与物性跨尺度耦合	主任
2	陈立泉	中国科学院	正高	纳米离子学；纳米离子材料和离子电子混合导电材料的制备和表征等	副主任
3	张统一	香港科技大学	正高	分子动力学和相场模拟，计算热力学和连续介质力学，材料力学	副主任
4	陈龙庆	美国宾夕法尼亚大学	正高	发展先进工程材料中预测微结构演化的相场方法和多尺度计算模型	委员
5	刘国权	北京科技大学	正高	材料计算、优化设计与数据库	委员
6	聂祚仁	北京工业大学	正高	生态环境材料学、工业领域节能减排	委员
7	王富耻	北京理工大学	正高	高应变率服役新材料；高温高能防护涂层材料	委员
8	宫声凯	北京航空航天大学	正高	先进热障涂层材料技术先进轻质高温结构金属间化合物材料	委员
9	左禹	北京化工大学	正高	材料环境断裂，材料局部腐蚀机理与控制技术，材料表面保护技术	委员
10	苏航	钢铁研究总院	正高	材料数据技术与共享；计算机辅助材料设计；热力学动力学计算及其在钢铁新产品研发中的应用	委员

备注：学术委员会职务：主任、副主任、委员三类。

2、学术委员会召开情况

序号	时间	地点	学术委员会出席名单	学术委员会主要建议
1	2016-06	北京科技大学腐蚀楼 406 会议室	张统一、刘国权、聂祚仁、苏杭	讨论目前实验室各课题组的研究进展，制定实验室下一步发展方向

五、开放交流情况明细表

1、开放课题

序号	开放课题名称	负责人	职称	工作单位	起止时间		总经费（万元）
					开始时间	结束时间	

2、访问学者

序号	姓名	国别	单位	访问时间与成效
----	----	----	----	---------

3、向社会开放

序号	开放时间	开放方式与成效
----	------	---------

4、学术会议交流：（仅限主/承办会议，参与性会议不予填写）

序号	学术会议名称	会议类别	时间	地点	主要议题
1	2016 年材料科学数据培训研讨会	国内	2016-06	北京	材料数据库建设
2	2016CODATA 科学数据大会，材料科学数据分会	国内	2016-08	上海	材料大数据
3	2016 北京科技大学-日本东北大学双边交流会	国际	2016-03	北京	先进材料制造

备注：会议类别指国际会议和国内会议。

5、在国际会议做特邀报告

序号	学术会议名称	时间	地点	特邀报告主讲人	报告主题
1	越南第五届亚洲材料数据会议	2016-10	越南, 河内	尹海清	作大会特邀报告
2	The 2016 International Union of Materials Research Societies (IUMRS) International Conference on Electronic Materials (ICEM2016)	2016-07	新加坡	尹海清	分会召集人之一, 作分会邀请报告
3	Joint International Conference on CJK 2016 大会	2016-05	韩国, 首尔	尹海清	作会议邀请报告

六、依托单位支持情况明细表

1、实验室现有科研用房面积

序号	建筑物名称	楼层	房间号	面积 (平方米)	备注
1	科技楼	2	203	200.0	
2	金物楼	2	223	100.0	
3	腐蚀楼	4	408	180.0	
4	主楼	2	228	230.0	
5	腐蚀楼	4	413	160.0	
6	金物楼	1	103	120.0	
7	主楼	2	213	130.0	

8	腐蚀楼	3	311	220.0	
9	腐蚀楼	3	313	180.0	
10	金物楼	2	209	160.0	
11	金物楼	2	225	200.0	

2、实验室现有 5 万元以上仪器设备

序号	设备名称	型号	原值 (万元)	数量	存放地点			是否纳入“首都科技条件平台开放仪器设备”	备注
					建筑物	楼层	房间号		
1	装有多种材料计算软件的高性能计算机	安装热力学计算软件 Thermo-Calc, 性能计算软件 JMatPro、有限元计算软件 Ansys 等软件。	100.0000	1	测试楼	1	10	否	
2	扫描电镜+能谱+EBSD 系统		500.0	1	测试楼	1	10	否	
3	X 射线衍射仪	D5000	138.0	1	测试楼	1	10	否	

4	刀片服务器群 196 核, Intel E5650	Dell M610	100.0	1	测试楼	1	10	否	
5	刀片服务器群 192 核, Intel E6-2660	Dell M620	100.0	1	测试楼	1	10	否	
6	Dell 服务器 48 核		10.0	1	测试楼	1	10	否	
7	HP 服务器 48 核		10.0	1	测试楼	1	10	否	
8	容天服务器 12cpu 核+4Tesla-gp (1700Processor)		5.0	1	测试楼	1	10	否	
9	电液伺服疲劳试验机	SLP-5	23.0	1	测试楼	1	10	否	
10	高精视频接触角测量仪		16.0	1	测试楼	1	10	否	
11	高效液相色谱仪	LC-20A	21.0	1	测试楼	1	10	否	

12	纳米粒度分析仪	Desa Nano	50.0	1	测试楼	1	10	否	
13	多功能熔铸炉		15.0	1	测试楼	1	10	否	
14	差热分析仪	RBTD-08056JP	30.0	1	测试楼	1	10	否	
15	超声波粉碎机	MK-2	53.0	1	测试楼	1	10	否	
16	真空甩带机	WK-IIB	27.0	1	测试楼	1	10	否	
17	振动样品磁强计	Quantum Design	80.0	1	测试楼	1	10	否	
18	低温强磁场测量仪		113.0	1	测试楼	1	10	否	
19	原子力显微镜		240.0	1	测试楼	1	10	否	

第三部分 重点实验室技术成果、需求统计

一、 技术成果

序号	技术成果名称	所属领域	细分领域	技术描述	技术水平	当前所处阶段
----	--------	------	------	------	------	--------

备注：

- 1、所属领域指新一代信息技术、生物医药、新能源、节能环保、汽车与交通运输、新能源汽车、新材料、高端装备制造、航空航天、医疗卫生、现代农业、公共安全、文化创意、科技服务业、战略研究 15 大领域。
- 2、细分领域由各机构根据研方向自行填写。
- 3、技术水平指国际领先、国际先进和国内领先三类。
- 4、当前所处阶段指研发、小试、中试、产业化四个阶段。

二、 技术需求

需求项目信息

--

北京市重点实验室

第四部分 实验室主任及依托单位意见

实验室主任（签字）：

依托单位（盖章）

年 月 日

北京市重点实验室